



TITLE:

21.化学吸着の強結合理論(固体表面及び吸着子の理論,研究会報告)

AUTHOR(S):

沢田, 信一

CITATION:

沢田, 信一. 21.化学吸着の強結合理論(固体表面及び吸着子の理論,研究会報告). 物性研究 1980, 33(4): 201-202

ISSUE DATE:

1980-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89900>

RIGHT:

20. Newns-Anderson モデルについての comment

阪大基礎工 吉 森 昭 夫

相互作用のある不純物系（吸着子系も含まれることになる）に対する Friedel の総和則の議論はすでに種々なされている¹⁾。ここでは一般的に総和則が相互作用についての保存則と密接な関係があることを示す²⁾。例を軌道縮退のある Anderson モデルにとると、 σ をスピン、 m は軌道を表すとして、 $\langle n_{m\sigma} \rangle$ を $m\sigma$ 局在状態にある電子数、 $\sum_k \langle n_{km\sigma} \rangle$ を対応する伝導電子の局在電子数に対して

$$\sum_{m\sigma} C_{m\sigma} (\sum_k \langle n_{km\sigma} \rangle + \langle n_{m\sigma} \rangle) = \sum_{m\sigma} C_{m\sigma} \frac{1}{\pi} \text{Im} \log G_{m\sigma}(i0^+)$$

が成立することを証明することができる。 $C_{m\sigma}$ は 1, σ または m である。 $G_{m\sigma}(i\omega)$ は $m\sigma$ 状態の Green 関数で、 $m\sigma$ 状態のエネルギー準位は $m\sigma$ に依存して異っていてもよい。

1) H. Shiba, Prog. Theor. Phys. 54 (1975) 967

2) L. Mihály and A. Zawadowski, J. Physique 39 (1978) L-483

21. 化学吸着の強結合理論

京大理 沢 田 信 一

Paulson と Schrieffer¹⁾ (P-S と略記する。) による Induced Covalent Bond 理論は、V.B. 法による化学吸着理論であり、金属表面上の水素原子の吸着を扱っている。このとき、取り入れられているのは、neutral configuration のみであるが、異核二原子分子では、ionic configuration からの寄与が大きいことから考えて、水素原子の遷移金属表面上への吸着の際にも、ionic configuration の寄与が大きいことが期待される。そ

れで、P-S の formalism に沿って、強結合極限の場合に限って、ionic configuration を取り入れた計算を行なった。このとき、系は、surface molecule とくりぬかれた結晶の二つの部分に分かれるが、P-S はくりぬかれた結晶を、surface molecule を構成している金属原子の最近接原子だけに置き換えをという近似を行なっている。筆者は、surface Green 関数を用いて、くりぬかれた結晶が半無限であることによる効果を取り入れた計算を行ない、P-S の近似が妥当でないことを示した。また、ionic configuration からの寄与が、吸着原子と表面間の距離を変えたとき、かなりの領域で重要であること、そして、強結合近似が妥当であることを示した。最後の強結合近似の妥当性については、MO. 法の観点からも調べる予定である。

1) P. H. Paulson and J. R. Schrieffer; Surf. Sci. 48 (1975) 329

22. 相転移近傍での熱脱離異常

相模工大 佐々田 友 平

Substrate の相転移近傍のオーダパラメータと結合する吸着子のポテンシャルを無秩序相で計算する。表面効果を substrate の自由エネルギーにとり入れる。表面エネルギーが負の場合、即ち表面秩序が現われる場合、ポテンシャルは、対数発散を示す。絶対反応速度論にのって、熱脱離の問題を議論する。

23. 物理吸着系の相転移

九大理 太 田 隆 夫

物理吸着系の相転移のうち registered 相から non-registered 相への転移¹⁾ 及び non-